

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОРБИТАЛЬНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ МОНОСЛОЯ ЧЕРНОГО ФОСФОРА

Пушкарев Г.В.^{1*}, Прищенко Д.А.¹, Мазуренко В.Г.¹, Руденко А.Н.^{1,2}

¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Институт Молекул и Материалов, Неймеген, Нидерланды

*E-mail: puskarev.g.v@gmail.com

MODELING OF BLACK PHOSPHORUS MONOLAYER ORBITAL SUSCEPTIBILITY

Pushkarev G.V.^{1*}, Prishenko D.A.¹, Mazurenko V.G.¹, Rudenko A.N.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute for Molecules and Materials, Radboud University, Nijmegen, The Netherlands

Results of first principle calculation of orbital susceptibility for black phosphorus monolayer using tight binding model hamiltonian and perturbation theory.

Двумерные материалы привлекают широкий круг исследователей благодаря своим уникальным свойствам, но экспериментальное получение таких материалов затруднено, поскольку синтез таких материалов, как правило, стоит больших затрат. Первопринципные методы позволяют изучать свойства данных объектов для дальнейшего возможного получения их в ходе эксперимента.

Монослой черного фосфора, представляет собой одну из многих двумерных физических систем, получаемую экспериментально. Как и графен, данная система обладает уникальными свойствами, что обуславливает интерес к её изучению[1]. Наиболее интересно выяснить основные магнитные свойства системы, поскольку зная их, можно более четко определить область применения данного материала. Одним из таких свойств является отклик системы на магнитное поле, который задается магнитной восприимчивостью.

В качестве одного из методов исследования свойств материалов выступает метод сильной связи (*tight binding approximation*). В работе [2], используя теорию возмущений, в рамках метод сильной связи была получена наиболее общая формула для орбитальной восприимчивости χ_{orb} :

$$\chi_{orb}(\mu, T) = -\frac{\mu_0 e^2}{12\hbar^2} \frac{Im}{\pi S} \int_{-\infty}^{+\infty} n_F(E) \text{Tr}(U_k - 4V_k) dE \quad (1)$$

Где, $n_F(E)$ - функция распределения Ферми-Дирака, μ - химический потенциал системы, T - температура, Im - мнимая часть, а Tr - оператор следа матрицы. U_k и V_k представляют собой матрицы полученные соответствующим образом:

$$U_k = gh^{xx}gh^{yy} - gh^{xy}gh^{xy} \quad (2)$$

$$V_k = gh^x gh^x gh^y gh^y - gh^x gh^y gh^x gh^y \quad (3)$$

Здесь, g -матрицы соответствующие операторам функции Грина, а h^{ij} - матрицы гамильтониана системы продифференцированные по соответствующим компонентам i и j , векторов обратной решетки \vec{k} .

На рисунке 1 представлена полученная в ходе моделирования орбитальная восприимчивость как функция допирования при различных значениях параметров входящих в модель. Можно сделать вывод, что вблизи уровня ферми данная система демонстрирует парамагнитный характер с отчетливо наблюдаемым плато.

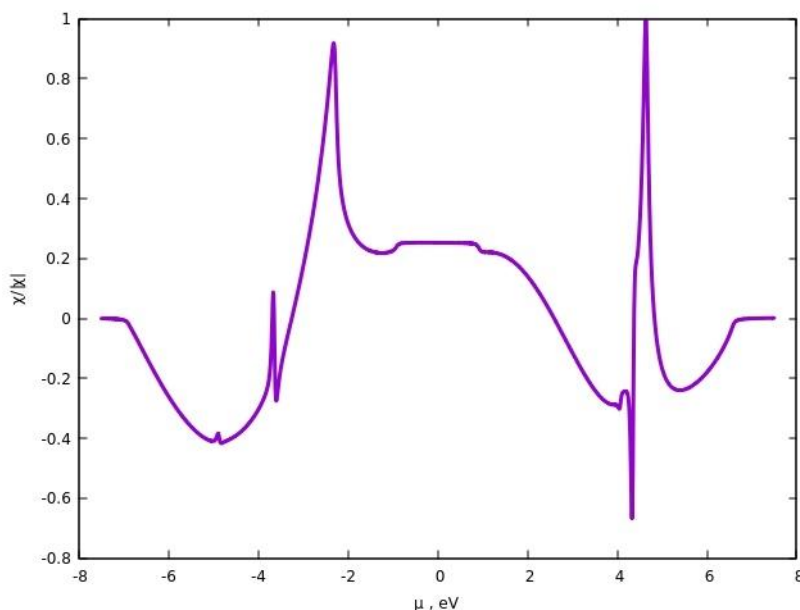


Рис. 1. Орбитальная восприимчивость монослоя черного фосфора как функция допирования.

Работа выполнена при поддержке гранта № 17-72-20041 Российского Научного Фонда.

1. Rudenko A. N., Shengjun Yuan, and Katsnelson M. I., Phys. Rev. B 93, 199906 (2016)
2. Arnaud R., Frédéric P., Phys. Rev. B 91, 085120 (2015).